

Erste Erfahrungen mit IUCLID 5 im Unternehmen

Dr. Manuela Cramer

BASF AG



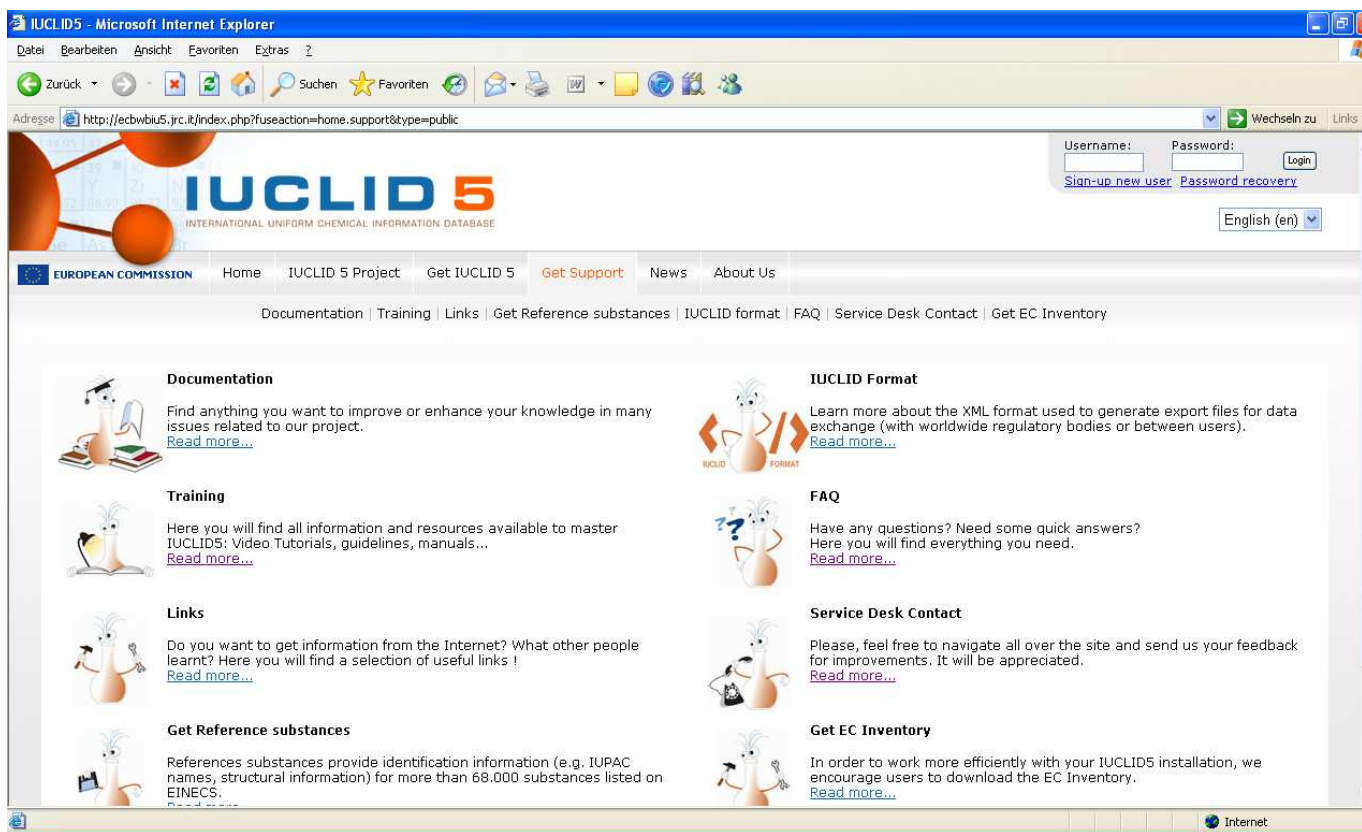
The Chemical Company

- **Der Start mit IUCLID 5**
- **Technische und organisatorische Vorbereitungen**
- **Stofforganisation / Arbeit mit Templates**
- **Migration der IUCLID 4 – Daten**
- **Probleme / Unklarheiten**
- **Schnittstellen**
- **Diskussion**

- **Der Start mit IUCLID 5**
- **Technische und organisatorische Vorbereitungen**
- **Stofforganisation / Arbeit mit Templates**
- **Migration der IUCLID 4 – Daten**
- **Probleme / Unklarheiten**
- **Schnittstellen**
- **Diskussion**

Verfügbare Informationen über IUCLID 5

■ IUCLID 5 – Homepage (<http://ecbwbiu5.jrc.it>)



IUCLID 5
INTERNATIONAL UNIFORM CHEMICAL INFORMATION DATABASE

EUROPEAN COMMISSION | Home | IUCLID 5 Project | Get IUCLID 5 | **Get Support** | News | About Us

Documentation | Training | Links | Get Reference substances | IUCLID format | FAQ | Service Desk Contact | Get EC Inventory

Documentation
Find anything you want to improve or enhance your knowledge in many issues related to our project.
[Read more...](#)

Training
Here you will find all information and resources available to master IUCLID5: Video Tutorials, guidelines, manuals...
[Read more...](#)

Links
Do you want to get information from the Internet? What other people learnt? Here you will find a selection of useful links!
[Read more...](#)

Get Reference substances
References substances provide identification information (e.g. IUPAC names, structural information) for more than 68.000 substances listed on EINECS.
[Read more...](#)

IUCLID Format
Learn more about the XML format used to generate export files for data exchange (with worldwide regulatory bodies or between users).
[Read more...](#)

FAQ
Have any questions? Need some quick answers? Here you will find everything you need.
[Read more...](#)

Service Desk Contact
Please, feel free to navigate all over the site and send us your feedback for improvements. It will be appreciated.
[Read more...](#)

Get EC Inventory
In order to work more efficiently with your IUCLID5 installation, we encourage users to download the EC Inventory.
[Read more...](#)

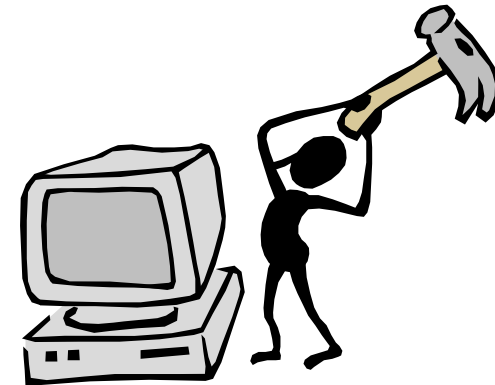
Username: Password:
[Sign-up new user](#) [Password recovery](#)

English (en)

Verfügbare Informationen über IUCLID 5

- IUCLID 5 – Homepage (<http://ecbwbiu5.jrc.it>)
- IUCLID 5 – Helpdesk
- Handbuch
- F1-Hilfe
- ...

- Beta Test
- Test Kategorien, Mixtures
- Migrationstool
- Pre-Release Test



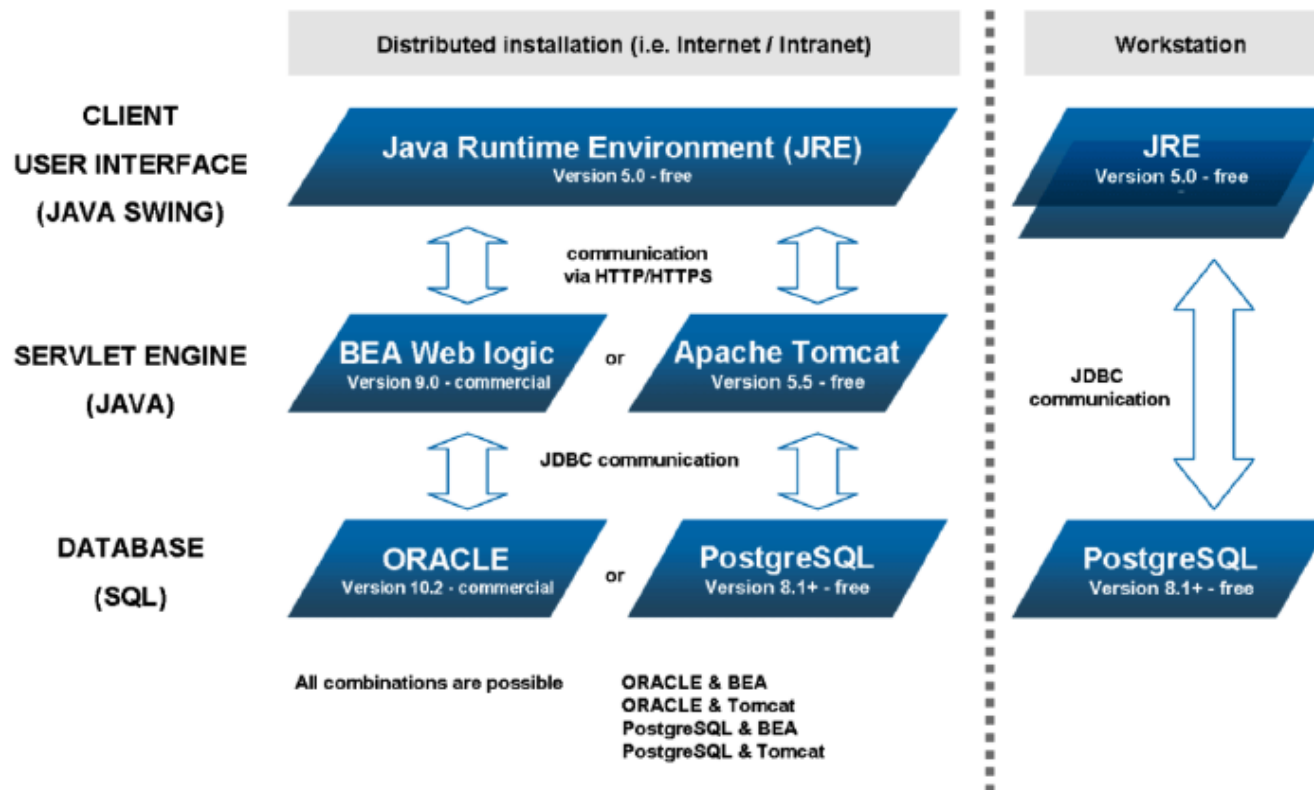
Mögliche Testszenarien im Unternehmen

- Dateneingabe
- Datenmigration
- Datenaustausch intern / mit anderen Firmen
- Stofforganisation
- Berechtigungskonzept
- ...

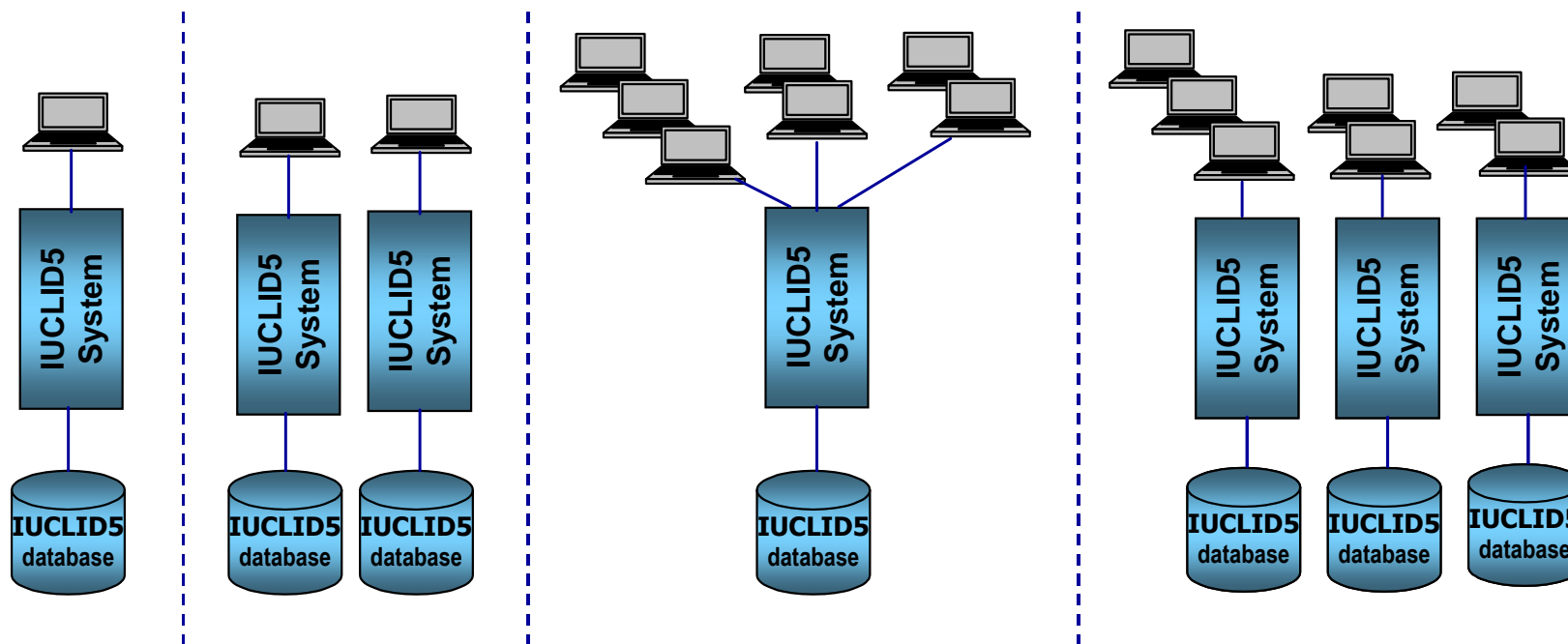
- **Der Start mit IUCLID 5**
- **Technische und organisatorische Vorbereitungen**
- **Stofforganisation / Arbeit mit Templates**
- **Migration der IUCLID 4 – Daten**
- **Probleme / Unklarheiten**
- **Schnittstellen**
- **Diskussion**

Technische Voraussetzungen

IT architecture of IUCLID 5 – supported servers



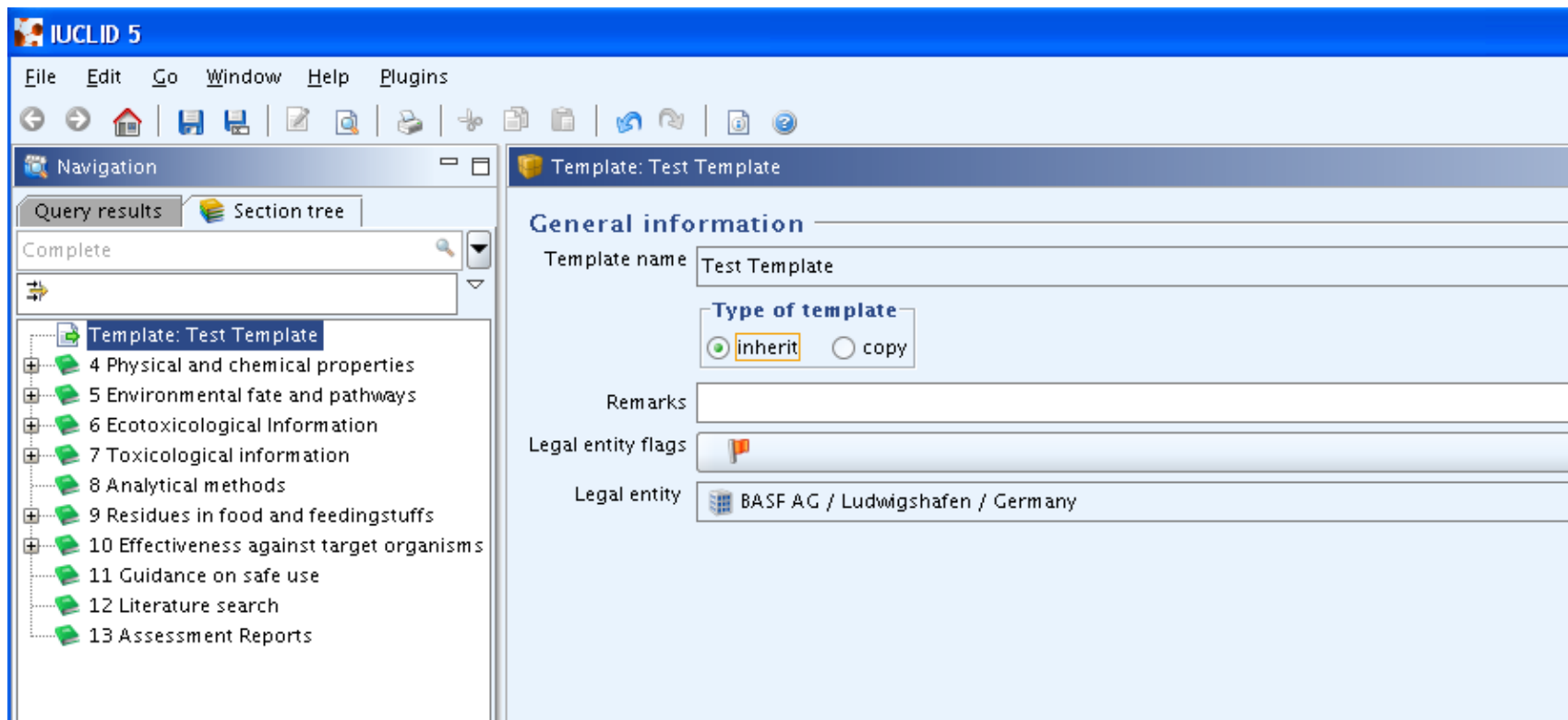
Stand-alone / Distributed installation



- User-/Rollen-Management, Berechtigungskonzept
- LEO-Management
- Stofforganisation
- Stoffadministration
- Pflegeregeln / Anleitungen / Schulung
- Definition von Workflows

- **Der Start mit IUCLID 5**
- **Technische und organisatorische Vorbereitungen**
- **Stofforganisation / Arbeit mit Templates**
- **Migration der IUCLID 4 – Daten**
- **Probleme / Unklarheiten**
- **Schnittstellen**
- **Diskussion**

Templates in IUCLID 5



The screenshot displays the IUCLID 5 software interface. The main window is titled "Template: Test Template" and shows the "General information" section. The "Template name" is set to "Test Template". Under "Type of template", the "inherit" radio button is selected, and the "copy" radio button is unselected. The "Remarks" field is empty. The "Legal entity flags" field shows a flag icon. The "Legal entity" field is set to "BASF AG / Ludwigshafen / Germany".

IUCLID 5
File Edit Go Window Help Plugins

Navigation
Query results Section tree
Complete

Template: Test Template

- 4 Physical and chemical properties
- 5 Environmental fate and pathways
- 6 Ecotoxicological Information
- 7 Toxicological information
- 8 Analytical methods
- 9 Residues in food and feedingstuffs
- 10 Effectiveness against target organisms
- 11 Guidance on safe use
- 12 Literature search
- 13 Assessment Reports


Template: Test Template


General information

Template name: Test Template

Type of template
 inherit copy

Remarks:

Legal entity flags: 

Legal entity:  BASF AG / Ludwigshafen / Germany

Templates in IUCLID 5



The screenshot displays the IUCLID 5 interface for a substance named 'Test Substance / BASF AG / Ludwigshafen / Germany'. The left sidebar shows a navigation tree with categories from 0 to 13. The main content area is titled 'Substance: Test Substance / BASF AG / Ludwigshafen / Germany' and is divided into two sections: 'Inherit' and 'Copy'. The 'Inherit' section lists 'Test Template' as the source of inherited data. The 'Copy' section lists 'Copy Templates...' as the source of copied data. Buttons for 'Add...', 'Delete', and 'Go to link target' are visible under the 'Inherit' section.

Test Substance / BASF AG / Ludwigshafen / Germany - IUCLID 5

File Edit Go Window Help Plugins

Navigation

Query results Section tree

Complete

- 0 Related Information
 - 0.1 Templates
 - 0.2 Categories
 - 0.3 Mixtures
- 1 General Information
- 2 Classification and Labelling
- 3 Manufacture, use and exposure
- 4 Physical and chemical properties
- 5 Environmental fate and pathways
- 6 Ecotoxicological Information
- 7 Toxicological information
- 8 Analytical methods
- 9 Residues in food and feedingstuffs
- 10 Effectiveness against target organisms
- 11 Guidance on safe use
- 12 Literature search
- 13 Assessment Reports

Substance: Test Substance / BASF AG / Ludwigshafen / Germany

Templates

Inherit

Endpoint study records and summaries inherited from the following templates are only available in read-only within this substance
Modifications to the inherited data are only possible by going back to the template

- Test Template

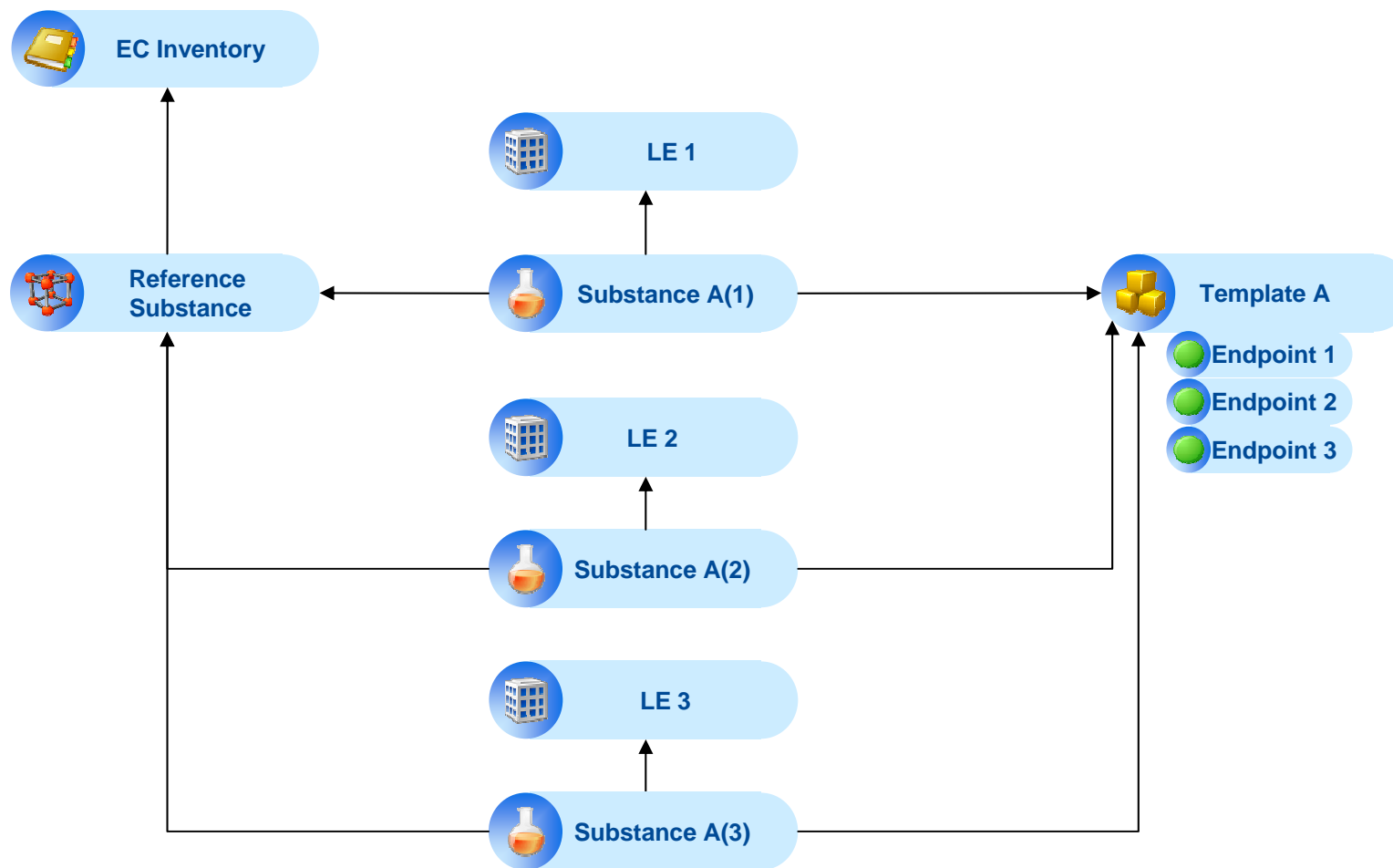
Add... Delete Go to link target

Copy

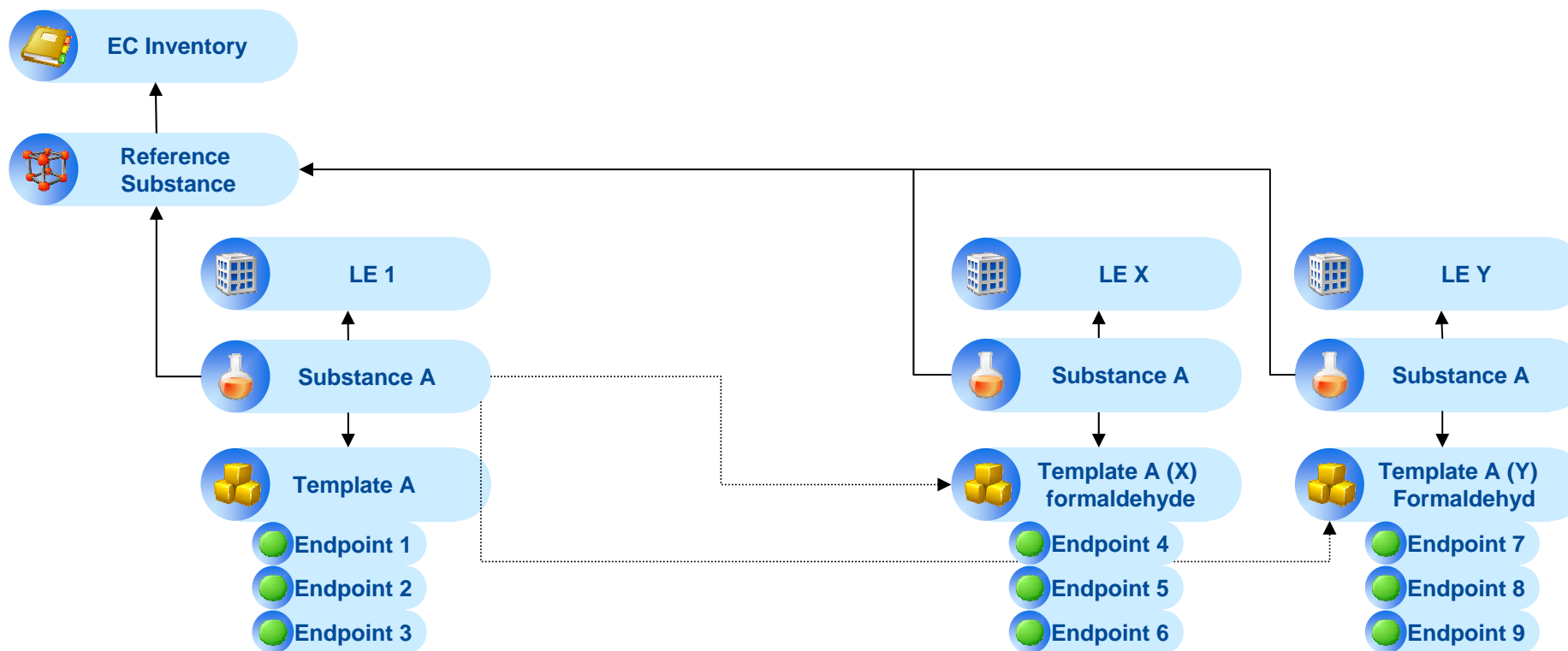
Endpoint study records and summaries from the following templates will be copied into the substance
Data can be later modified directly in this substance

Copy Templates...

Stofforganisation (intern)



Stofforganisation (Datenaustausch)



Vorteile der Endpunkt-Datenpflege in Templates

- Verknüpfung mit mehreren Substanzen möglich
- Vereinfachung der Datenaustauschs / Zeitersparnis
- Flexibilität beim Entfernen und Hinzufügen von Daten
- Berechtigungskonzept: Für die Eingabe von Endpunktdaten am Template braucht man keinen Schreibzugriff auf die Substanz.

FAZIT: Die Pflege der Endpunktdaten in Templates verringert den organisatorischen und zeitlichen Aufwand, v.a. beim Austausch von Daten.

- **Der Start mit IUCLID 5**
- **Technische und organisatorische Vorbereitungen**
- **Stofforganisation / Arbeit mit Templates**
- **Migration der IUCLID 4 – Daten**
- **Probleme / Unklarheiten**
- **Schnittstellen**
- **Diskussion**

Datenmigration IUCLID 4 → IUCLID 5

- IUCLID 4: viele Freitextfelder
- IUCLID 5: viele strukturierte Felder
- Nach der Migration stehen die Daten immer noch im Freitext, während viele strukturierte Felder leer sind.
- **Eine Bereinigung würde sehr viel Nacharbeit bedeuten.**
- Migration report (enthält nicht übertragbare Daten sowie Bemerkungen zu Daten, die nicht eindeutig zugeordnet werden können)
- Tipp: gute Vorbereitung der Daten in IUCLID 4

- **Der Start mit IUCLID 5**
- **Technische und organisatorische Vorbereitungen**
- **Stofforganisation / Arbeit mit Templates**
- **Migration der IUCLID 4 – Daten**
- **Probleme / Unklarheiten**
- **Schnittstellen**
- **Diskussion**

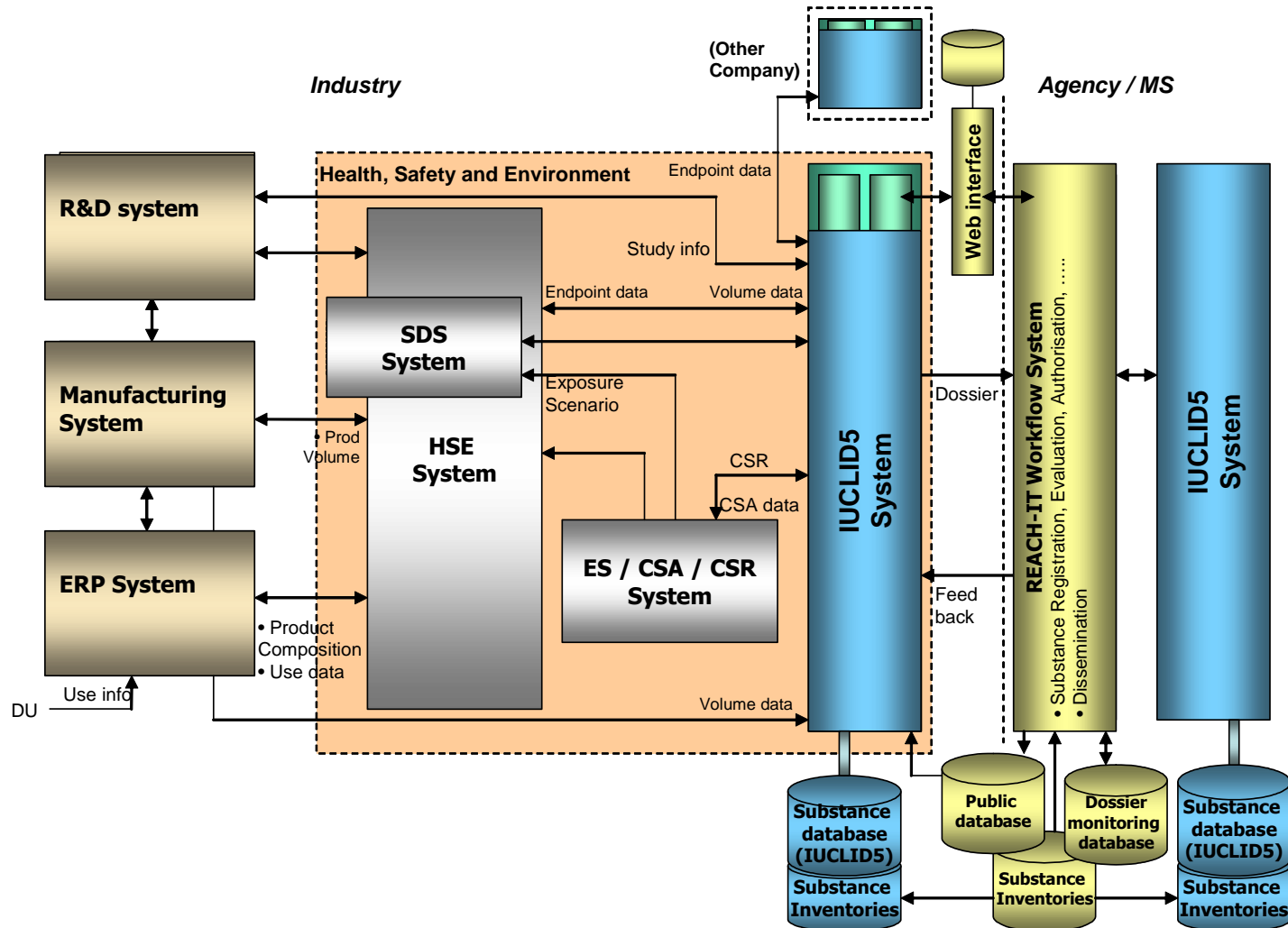
- sehr viele Felder → **großer Pflegeaufwand**
- Berechtigungskonzept ermöglicht keinen selektiven Lesezugriff (**jeder** Benutzer kann **alle** Daten sehen)
- keine Suche nach Daten möglich (**Query Tool fehlt noch**)
- **Printfiles** sind nicht gut strukturiert und daher sehr unübersichtlich
- keine Möglichkeit zur Erstellung einer Literaturliste eines Datensatzes
- Eine externe Befüllung der „**Reference library**“ wäre nützlich, ist im License agreement aber nicht vorgesehen.
- Die Information, auf welche Felder der **Completeness Check** schaut, fehlt. **Die Verfügbarkeit des Completeness Check Tools in IUCLID 5 wäre hilfreich.**

- **Der Start mit IUCLID 5**
- **Technische und organisatorische Vorbereitungen**
- **Stofforganisation / Arbeit mit Templates**
- **Migration der IUCLID 4 – Daten**
- **Probleme / Unklarheiten**
- **Schnittstellen**
- **Diskussion**

Warum Schnittstellen ?

- Gewährleistung der notwendigen Datenkonsistenz (z.B. Technisches Dossier – SDB)
- Zeitersparnis (Vermeidung von Doppelpflege)
- ...

IT Architecture (Cefic Working Group)



- IUCLID 5 – SAP EH&S (VCI Taskforce)
- IUCLID 5 – andere HSE-Datenbanken
- CSA/CSR-Tool
- ...

- **Der Start mit IUCLID 5**
- **Technische und organisatorische Vorbereitungen**
- **Stofforganisation / Arbeit mit Templates**
- **Migration der IUCLID 4 – Daten**
- **Probleme / Unklarheiten**
- **Schnittstellen**
- **Diskussion**